

「京」の成果の総括、今後の実用化を加速

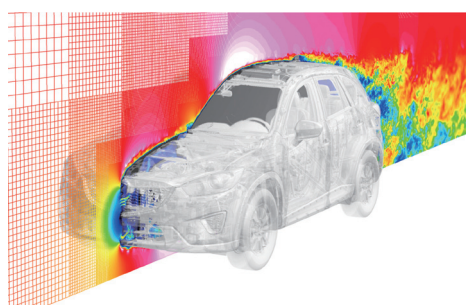
本ニュースレターは本年3月23日、24日の二日間にわたり当所で開催いたしました、HPCI戦略プログラム第6回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム(最終成果報告会)の報告を中心に企画・編集いたしました。ご存知のように、HPCI戦略プログラムは、我が国が誇るスーパーコンピュータ「京」の性能を最大限に生かして、これまでのスパコン等では到底実現できなかったような革新的な成果を創出すること(研究開発課題の推進事業)、得られた成果を関連するコミュニティに広く普及させること(計算科学技術推進体制の構築事業)を二本柱として、平成23年から5年間にわたり本格的に実施された文部科学省の事業です。戦略分野としては、合計5つの分野が選定され、当センターは「分野4次世代ものづくり」の代表機関として、日本原子力研究開発機構(JAEA)ならびに宇宙航空研究開発機構(JAXA)とネットワーク型の推進体制を組み、他の多くの大学等の研究機関とも連携してこの事業を推進してきました。

戦略分野4では5つの研究開発課題を設定し、産業界と強力に連携して、革新的な成果を創出すべく、数々の実証研究を展開するとともに、得られた成果を広く産業界に普及するための仕組みとして、計算工学ナビ(<http://www.cenav.org/>)というホームページを開設し、そこから定期的にニュースレターを配信し、これらの実証研究の成果のアウトリーチ活動に努めてきました。また、High Performance Computing Platform(HPC/PF)というプラットフォームを開発し、基礎検証や実証計算の事例データベースを構築し公開するとともに、ADVENTURECluster Solver、FrontISTR、FrontFlow/blue、FrontFlow/red、FrontFlow/violet、CHEETAH、PHASE、ABINIT-MPなどの例に関しては、手軽に試計算の実施が可能な15事例のデータセットを整備し公開してきました。

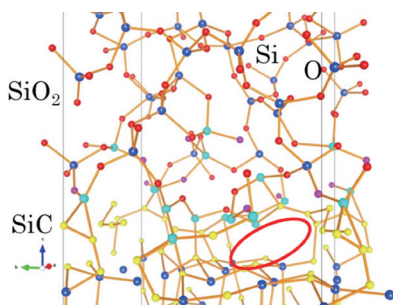
準備研究期間をふくめ6年間にわたり推進して参りました本事業は、連携した多くの研究機関の多大なご尽力、

ならびに、産業界の皆さまのご理解とご協力のお陰で、成功裏に終了することができました。しかしながら、これらの実証研究の成果の位置づけは、「京」のような高性能なスーパーコンピュータを駆使すれば従来とは格段にレベルの違う成果が創出できるということを示したということであり、これらの成果の実用化にまで漕ぎ着けたということではありません。現在、当センターは今年度から本格的に開始された、「京」の次のスパコンであるポスト「京」のための革新的なアプリケーション研究開発事業、いわゆる、「ポスト「京」重点課題」の課題8「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」の代表機関として、この事業の一旦を担っております。ポスト「京」の重点課題の成果も適宜展開しながら、戦略プログラムで創出された実証研究の成果の実用化を加速したいと考えておりますので、引き続き、関係各位のご理解と協力をお願いする次第です。

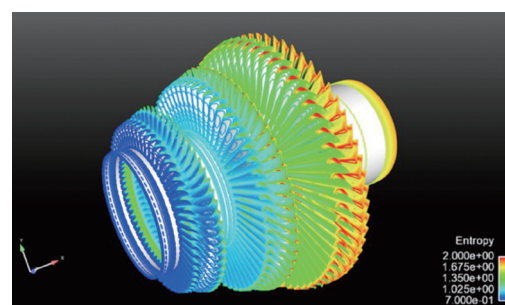
センター長・教授 加藤 千幸



BCMによるフルスケール自動車空力シミュレーション
提供:理化学研究所・神戸大学、協力:マツダ(株)



SiC(000-1)C/SiO₂界面の酸化反応シミュレーション:
温度2500Kで界面付近にO₂分子を逐次的に導入した
第一原理MD計算の25ピコ秒でのスナップショット構造
(界面付近にO₂分子が4分子導入されている)
提供:NIMS



蒸気タービンの多段全周解析(エントロピー分布)
提供:JAXA、三菱日立パワースステムズ(株)

分野4次世代ものづくりシンポジウム(最終成果報告会) — スパコン「京」がひらく科学と社会 — 開催報告

平成28年3月23日(水)、24日(木)の2日間にわたり、東京大学生産技術研究所コンベンションホールに於いて、第6回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム(最終成果報告会)を東京大学生産技術研究所、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の3機関合同にて開催しました。会場であるコンベンションホール前のホワイエでは、分野4次世代ものづくりの各課題およびポスト「京」重点課題プロジェクトの概要をポスター展示し紹介しました。

2011年度から実施してきた文部科学省HPCI戦略プログラムの事業も今回の最終成果報告会をもって実質的に終了しましたが、当初の目標を大幅に超える成果を創出でき、また、集大成である今回の成果発表でも産業応用の事例紹介が多く示され、今後のものづくりの在り方をイメージする上で大変参考になったと来場者から大変好評をいただきました。

おかげさまで161機関、延459名にご来場いただき成功裏に開催することができました。

3月23日(水)

▶ プロダクトイノベーションへの貢献

課題1 「輸送機器・流体機器の流体制御による 革新的効率化・低騒音化に関する研究開発」

課題責任者の藤井孝藏教授から、プラズマアクチュエータの優れた制御効果などこれまでに得られた成果とさらなる展開について紹介がありました。引き続きプラズマ気流制御技術の産業利用等について報告がされ、風車適用について(株)東芝 田中元史参事から、自動車空力への適用についてマツダ(株) 清水圭吾スペシャリストから、また、産業技術総合研究所 瀬川武彦主任研究員からは実験研究者の視点による気流制御技術について紹介されました。



藤井孝藏教授(東京理科大学)

課題2 「次世代半導体集積素子における カーボン系ナノ構造プロセス シミュレーションに関する研究開発」

課題責任者の大野隆央特命研究員から、グラフェン成膜プロセス、SiC酸化プロセス等のシミュレーションにおけるPHASE/0の有効性が報告され、物質・材料研究機構 山崎隆浩特別研究員からは、グラフェン成長機構の解明に向けて「京」を用いて得られた知見についての報告がありました。NTT物性科学基礎研究所 高村真琴研究員からは実験とシミュレーションの両面からのアプローチの重要性について、(株)東芝 清水達雄研究主幹からはSiCパワーデバイス特性向上を目指したシミュレーション研究が紹介されました。



大野隆央特命研究員(物質・材料研究機構)

▶ プロセスイノベーションへの貢献

課題3 「乱流の直接計算に基づく 次世代流体設計システムの研究開発」

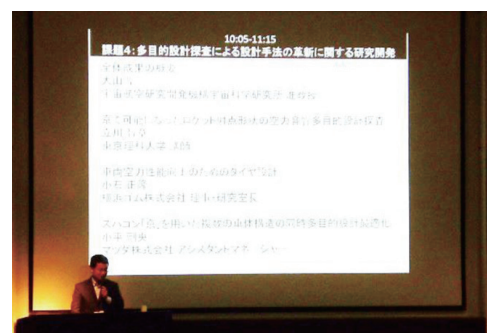
課題責任者の加藤千幸教授から、自動車、ターボ機械、燃焼及びガス化装置における研究成果の概要が紹介され、引き続き、神戸大学大学院 坪倉誠教授からは、自動車次世代空力・熱設計システムの開発について、自動車産業界からスズキ(株) 飯田桂一郎氏、(株)本田技術研究所 寺村実主任研究員、富士重工業(株) 小林竜也氏の研究開発の成果が紹介されました。また、(一財)日本造船技術センター 西川達雄課長からは乱流の直接計算に基づく次世代数値曳航水槽の開発について、京都大学 武藤昌也特定助教からは燃焼器設計開発支援のための燃焼数値シミュレーションについて紹介されました。



加藤千幸教授(東大生研)

課題4「多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発」

課題責任者の大山聖准教授から、多目的設計探査のアルゴリズムとソフトウェアの開発について紹介があり、引き続き「京」を利用して得られた成果の紹介がありました。東京理科大学 立川智章講師から「京」で可能になったロケット射点形状の空力音響多目的設計探査について、産業界からは、横浜ゴム(株) 小石正隆理事・研究室長から車両空力性能向上のためのタイヤ設計について、マツダ(株) 小平剛央アシスタントマネージャーから複数の車体構造の同時多目的設計最適化について紹介されました。



大山聖准教授(宇宙航空研究開発機構)

安心・安全社会構築への貢献

課題5「原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発」

課題責任者の中島憲宏副センター長から、耐震シミュレーション技術の「京」での利用とその高度化状況などの報告がありました。JAEA内の取り組みとしては、高温工学試験研究炉(HTTR)に対する実証計算の事例が紹介されました。引き続き、千代田化工建設(株) 松川圭輔技師長から石油・化学プラントにおける次世代耐震シミュレーションの活用について、(株)荏原製作所 杉山道子構造・振動解析グループ長からは一般産業機械における次世代耐震シミュレーションの活用について報告がされました。



中島憲宏副センター長(日本原子力研究開発機構)

計算科学技術推進体制構築

体制構築責任者の畑田敏夫特任教授から、4つのカテゴリー(使いやすくする、知ってもらう、活用できる人材を育てる、使ってもらう)に分類して実施した本事業の実績について報告されました。引き続き具体的な取り組みとして、理化学研究所計算科学研究機構チームリーダー/神戸大学大学院客員教授 小野謙二氏から大規模シミュレーションの実行支援環境の設計とそのプロトタイプの開発と成果について報告がされ、東大生研 川鍋友宏特任研究員からはアウトリーチ活動の成果と今後の展開について紹介がされました。



畑田敏夫特任教授(東大生研)

パネルディスカッション「今後の実用化に向けて」

最後に、各研究開発課題の目標達成状況を受け、今後の実用化をテーマにパネルディスカッションが行われました。

司会は加藤千幸教授、パネリストに東京理科大学 藤井孝藏教授、宇宙航空研究開発機構 大山聖准教授、(一財)日本造船技術センター 西川達雄課長、マツダ(株) 農沢隆秀技監、(株)東芝 福島伸首席技監を迎え、本事業の成果や今後の課題に関して活発な意見交換を行い、進むべき道筋を明確にするとともに、「京」のものづくりプロジェクトを総括し、シンポジウムを締めくくりました。



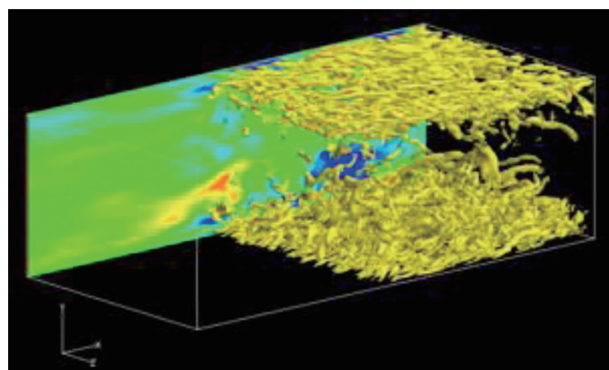
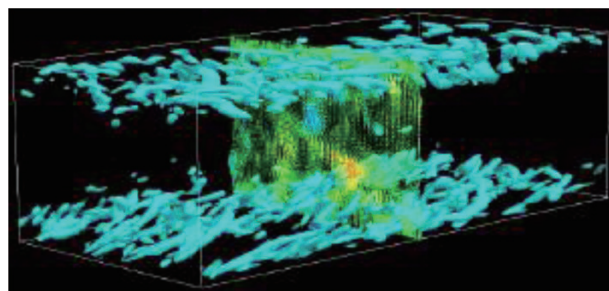
本格研究期間の5年間にわたり推進してきた本事業の詳しい内容は、「分野4次世代ものづくり：文部科学省「HPCI戦略プログラム」：総合成果報告書」(ISBN978-4-907968-02-1)でご覧いただけます。



半場 藤弘 教授

乱流現象を解明しモデル化する

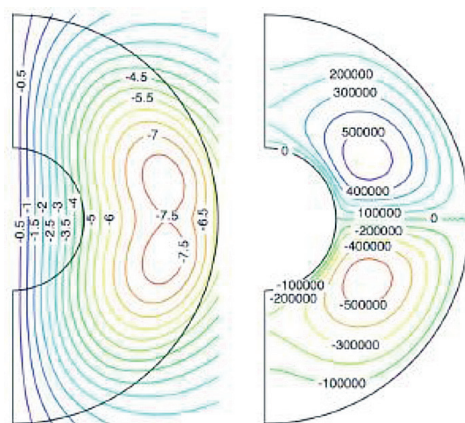
高レイノルズ数の乱流の数値計算を行うには、計算格子で捉え切れない小さな渦の効果をモデル化し、乱流粘性率として方程式に取り入れる必要があります。乱流モデルには、統計平均にもとづいたモデルと、計算格子サイズのフィルタリングにもとづいたモデルの2種類があります。それぞれの長所を生かすため、二つのモデルを組み合わせたハイブリッドモデルが提案されています。ただし二つを単につなげて数値計算するだけでは乱流の速度に不整合が生じることが知られています。本研究では、流体の基礎方程式に立ち戻り、不整合の原因を調べて取り除き、二つのモデルを融合した乱流モデルを理論的に導き開発することをめざしています。右下図は、平行平板間の乱流の数値実験で得られた速度場にハイブリッドモデルのフィルターを施したもので、乱流強度のふるまいや運動エネルギー方程式の収支を調べて考察しています。また、乱流速度の2点相関に着目し、異なる大きさの渦に伴う運動エネルギーの輸送の解明とモデル方程式の導出に取り組んでいます。



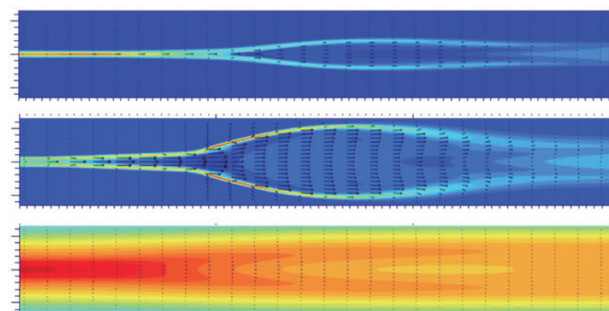
平行平板間乱流の速度場と渦
下図はハイブリッドフィルターを施した場合

電磁流体の乱流とモデリング

気体や液体の流れに燃焼、高速流、電磁流体、混相流など複雑な物理現象が加わると、ますます乱流モデルの開発がむずかしくなります。本研究では、複雑流体の一つの例として電磁流体の乱流の解明とモデリングに取り組んでいます。電磁流体は液体金属やプラズマ気体などの電導性のある流体で、プラズマ核融合などの工学装置や、地球や太陽などの天体現象で見られます。電流が流れると磁場が引き起こされるので、流体の運動と磁場の配位との相互作用が重要となります。例えば、地球の磁場は地球内部の核にある溶融鉄の運動により駆動され維持されていると考えられています。右上図は、地球の核を模擬した回転球殻内の電磁流体の運動を乱流モデルを用いて計算したもので、磁場や乱流統計量の分布を示しています。地球磁場のような大規模な磁場は、乱流によって拡散し減衰するだけでなく、逆に生成され維持されるダイナモ機構があることが知られています。右下図は、磁力線のリコネクション(つながりかえ)によって流体のジェットが引き起こされ、磁気エネルギーが運動エネルギーに変換される様子を、乱流モデルを用いて再現し考察したものです。



回転球殻の平均磁場と乱流ヘリシティ



磁気リコネクションによるジェットと電流



溝口 照康 准教授

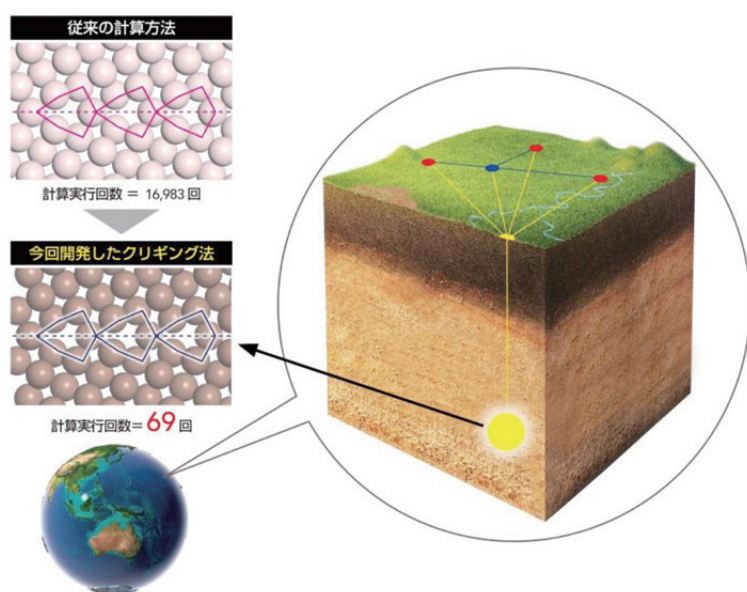


ビッグデータ解析法を用いて物質の界面の構造を決定するスピードを高速化

物質の界面は、電池や触媒など様々な機能と密接に関係しています。界面は接する結晶の方位関係によって多種多様な構造が形成されます。その一方で、一種類の界面の構造を決定するためには、数千～数万回という膨大な数の理論計算が必要でした。この高負荷な計算が、界面の系統的な研究を妨げてきました。

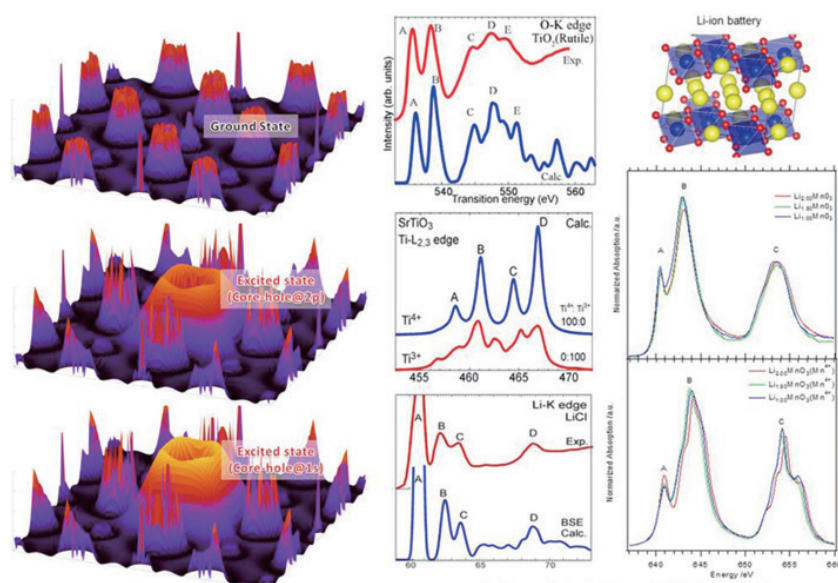
本研究グループでは、資源探索の分野のビッグデータ活用技術であるクリギング(Kriging)という空間補間法を活用し、100回程度の計算で界面構造を決定することに成功しました。従来の方法では界面の構造を決定するのに一か月程度かかることもありましたが、今回開発した手法では数時間で計算を終えることが出来ます。加えて、今回開発した手法が様々な物質に適用できることも明らかにしました。

本研究グループでは、情報科学(インフォマティクス)を活用したさらなる手法開発を行っております。



今回開発した手法の模式図。従来の方法では約17,000回の計算が必要であったが、今回開発したクリギング法により約70回での計算が可能になった。

「究極の分析法～ The Ultimate Analysis」のためのスペクトルシミュレーション



(左から順に)EELSが反映する励起状態の電子構造。1粒子・2粒子・多粒子理論によるスペクトル計算の結果。リチウムイオン電池正極材料のEELS理論計算

走査透過型電子顕微鏡(STEM)で測定される電子線エネルギー損失分光(EELS)は原子分解能で原子・電子構造解析が可能であり、Nature誌に「究極の分析法～ The Ultimate Analysis～」と称されるほど強力な分析法です。一方で、そのスペクトルの解釈には第一原理計算が不可欠です。本研究グループでは、1粒子・2粒子・多粒子理論に基づくEELSの理論計算法を開発し、物質研究に活用しています。

これまでに固体だけでなく、気体、液体のスペクトルを計算することに成功しております。さらに、スペクトルにおける分子振動、格子振動、ファンデルワールス力の効果も明らかにしています。

最近では、蓄電池として注目されているリチウム、ナトリウム、マグネシウムの吸収端を高精度に計算することに成功しました。

UPACSセミナー

平成28年2月19日(金)、東大生研セミナー室にてHPC/PFを利用したUPACS解析セミナーを開催しました。午前、午後の二部構成で延べ14名の方に参加していただき、圧縮性流体ソルバーUPACSおよびHPC/PFを紹介すると同時に、遠心圧縮機および蒸気タービンの事例解析を体験していただきました。



FOCUSトップセミナー

平成28年1月28日(木)神戸商工会議所会館にて開催の「第8回トップセミナー」に後援、企業団体展示コーナーに出展し実用的な計算科学シミュレーションソフトウェアの研究開発を紹介しました。展示時間が短かったにも関わらず、多くの方に展示をご覧頂くことができ、大変盛況のうちに終えることができました。また、参加者からは、質問、要望、期待等、今後の活動につながるご意見をたくさん頂くことができました。特に、ユーザー側からの声に加え、ソフトウェアやハードウェアのベンダー企業からの声も聞くことができた点が大きな収穫でした。



シンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」

平成28年1月29日(金)よみうり大手町ホールで開催のシンポジウム「スーパーコンピュータの今とこれから」に東大生研として共催し、分野4次世代ものづくり各課題の最新の研究成果をポスター展示によって紹介をしました。

会場には、HPCI戦略プログラム最終年度として、各分野それぞれその研究の集大成がポスター展示され、さらに、現在開発が進められている後継機、ポスト「京」や、今後ポスト「京」を用いて研究を行う重点課題についても紹介がされました。

参加者数は207名。講演では、5分野から各1名ずつの講演が行われ、5年間の「京」を使っでの研究成果が披露されました。パネルディスカッションでは、「京」やポスト「京」について議論が活発に行われました。ポスター発表時間も設けられ、ポスター会場には多くの来場者が集まり大変盛況でした。



イベント案内

第7回クラウドコンピュータ利用
FrontFlow/blueの設計実務セミナー

開催日：平成28年7月1日(金)
会場：神戸 公益財団法人計算科学振興財団
高度計算科学研究支援センター実習室

国際フロンティア産業メッセ2016

開催日：平成28年9月8日(木)～9日(金)
会場：神戸国際展示場(神戸ポートアイランド内)

計 算 工 学 ナ ビ

今すぐチェック!

Knowledge Base



解析事例データベース

最先端のシミュレーションソフトウェアによる、
さまざまな解析事例を収録

<http://www.cenav.org/>

編集後記

6年間にわたる「戦略プログラム」分野4次世代ものづくりのプロジェクトは最終成果報告会をもって終了しましたが、多くの成果が発表され、大変好評なシンポジウムでした。センターは、今後は主にポスト「京」重点課題の事業のサポートをしていきます。今後ともどうぞよろしくお願い申し上げます。

資料請求お問い合わせ先

TEL : 03-5452-6661
FAX : 03-5452-6662
E-mail : office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp
URL : <http://www.ciss.iis.u-tokyo.ac.jp/>

編集発行

東京大学生産技術研究所
革新的シミュレーション研究センター
〒153-8505
東京都目黒区駒場4-6-1